



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 07:36 pm GMT

PDB ID : 1QU6
Title : STRUCTURE OF THE DOUBLE-STRANDED RNA-BINDING DOMAIN
OF THE PROTEIN KINASE PKR REVEALS THE MOLECULAR BASIS
OF ITS DSRNA-MEDIATED ACTIVATION
Authors : Nanduri, S.; Carpick, B.W.; Yang, Y.; Williams, B.R.G.; Qin, J.
Deposited on : 1999-07-08

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

Cyrange	:	Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust	:	Kelley et al. (1996)
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	trunk28760
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	recalc28949

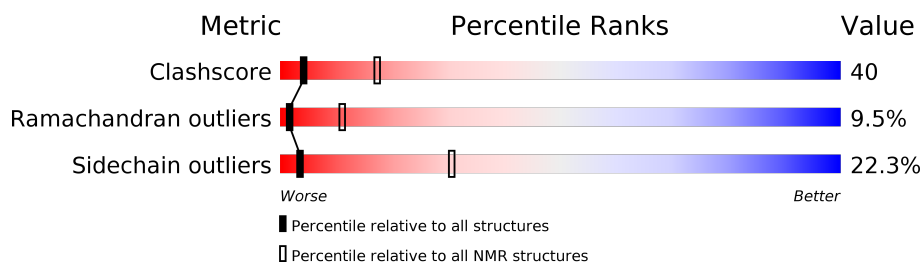
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	125131	11601
Ramachandran outliers	121729	10391
Sidechain outliers	121581	10367

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	179	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 21 models. Model 21 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

The following residues are included in the computation of the global validation metrics.

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:5-A:85, A:105-A:179 (156)	1.68	21

Ill-defined regions of proteins are excluded from the global statistics.

Ligands and non-protein polymers are included in the analysis.

The models can be grouped into 4 clusters and 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	3, 5, 6, 7, 11, 12, 14, 15, 18, 20, 21
2	9, 13, 19
3	8, 16, 17
4	1, 4
Single-model clusters	2; 10

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2765 atoms, of which 1385 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN KINASE PKR.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	179	Total	C	H	N	O	S	0
			2765	862	1385	243	267	8	

4 Residue-property plots [i](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

• Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR

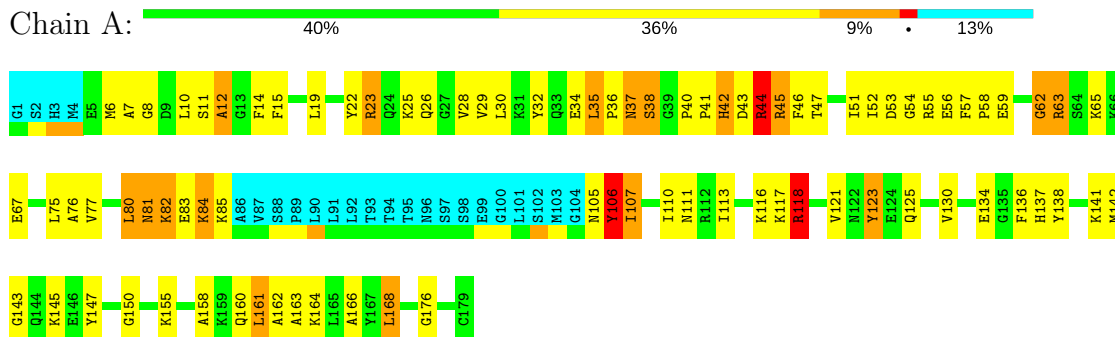


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

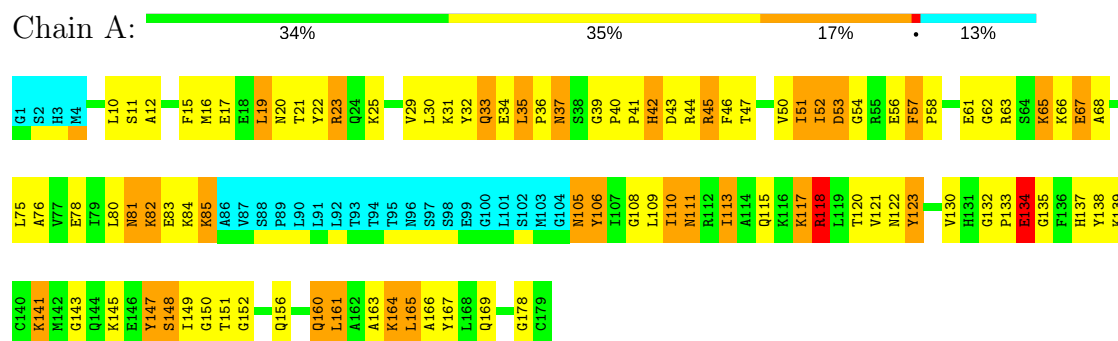
4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



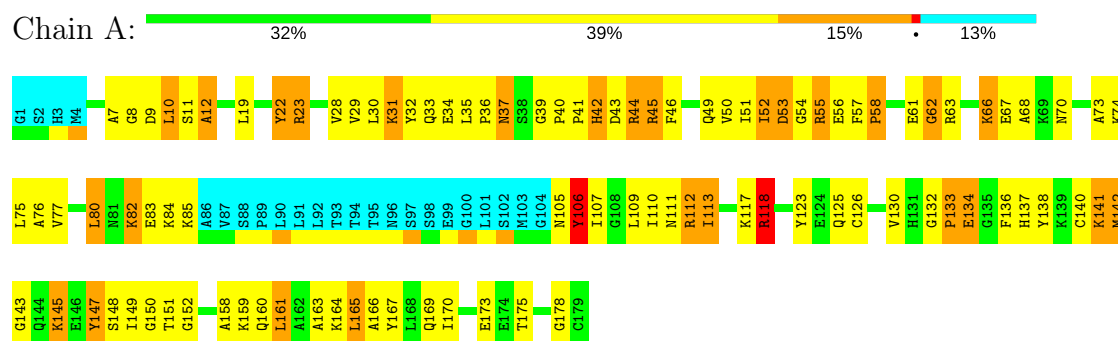
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



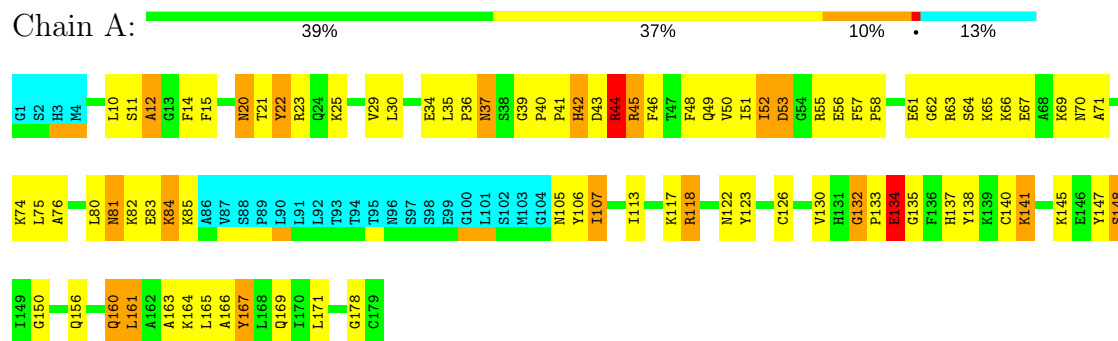
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



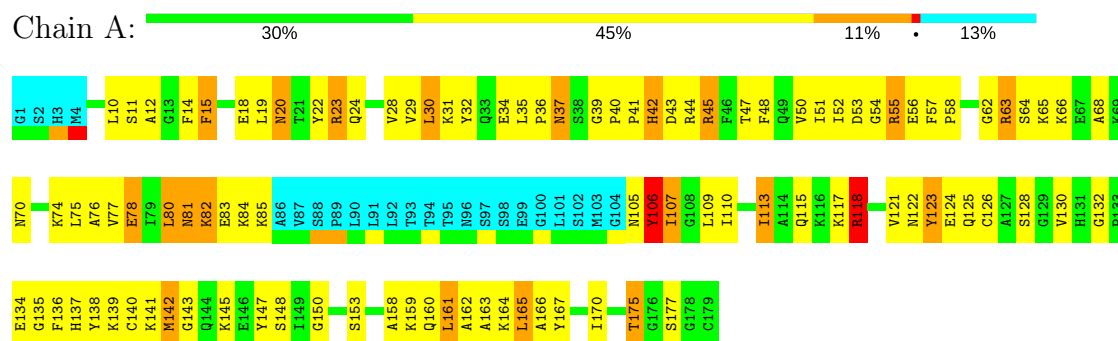
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



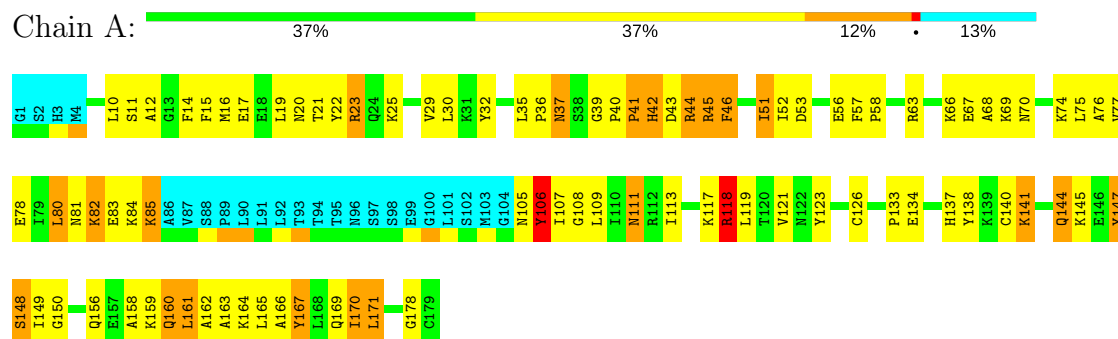
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



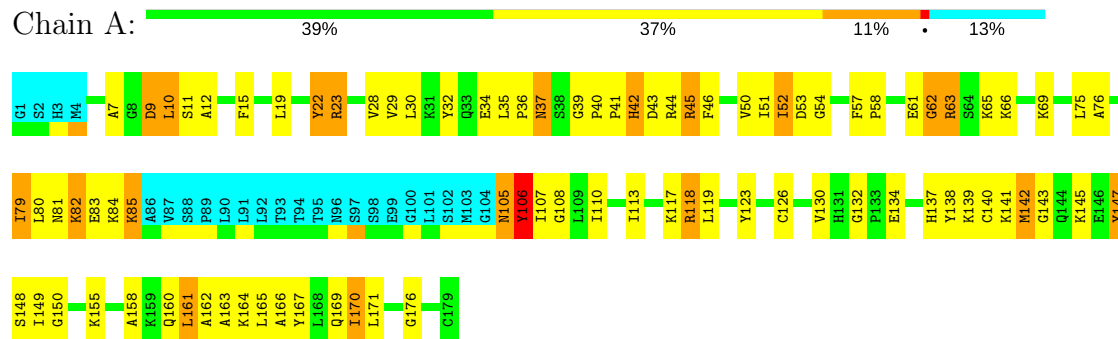
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



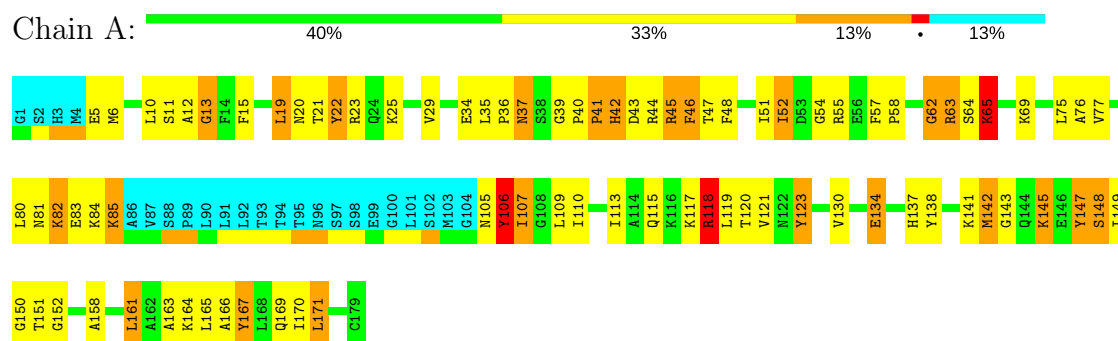
4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



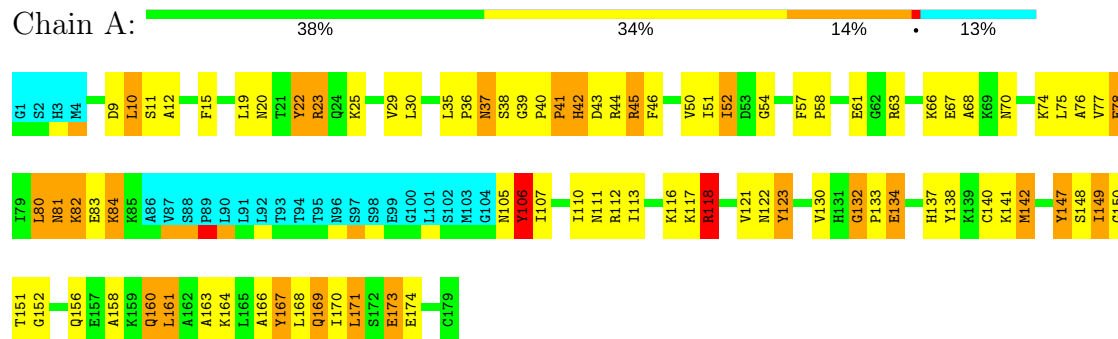
4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



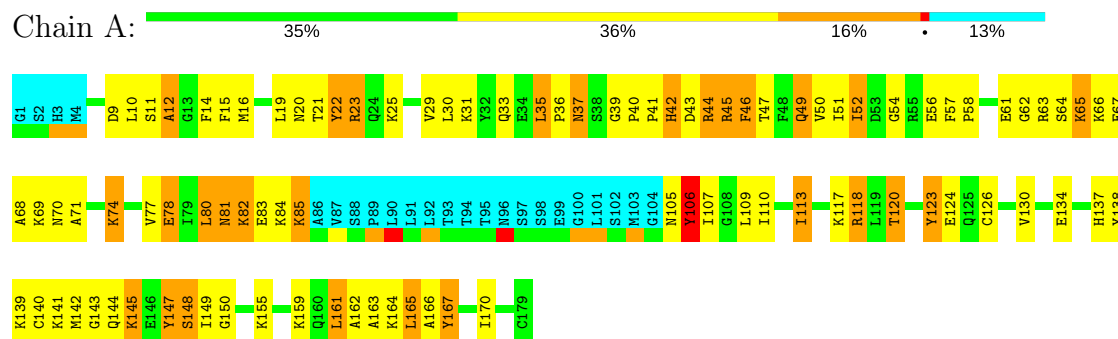
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



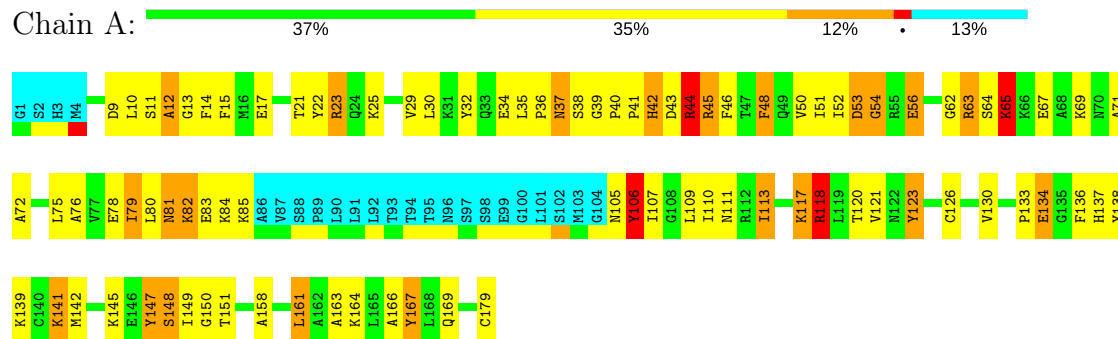
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



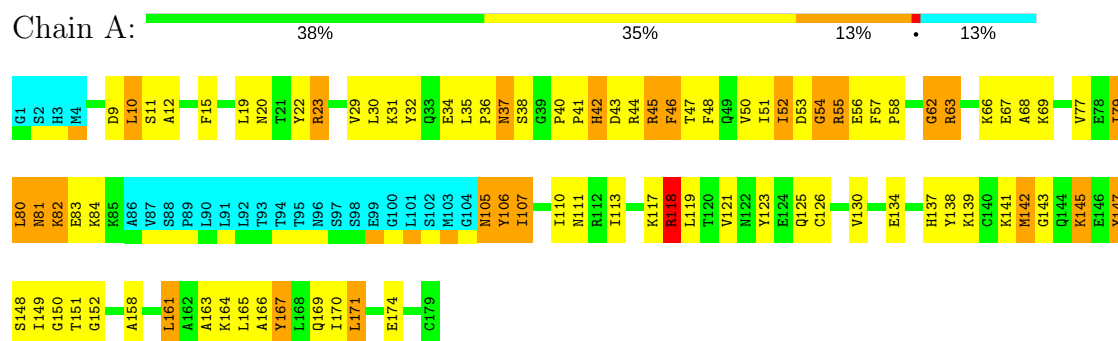
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



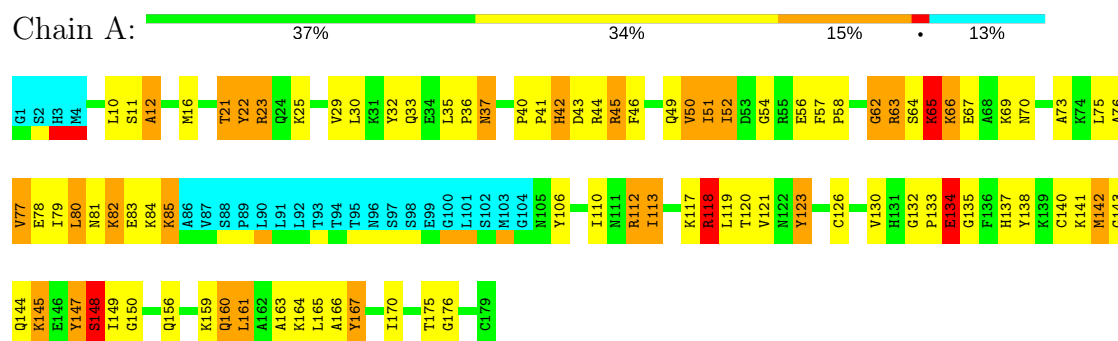
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



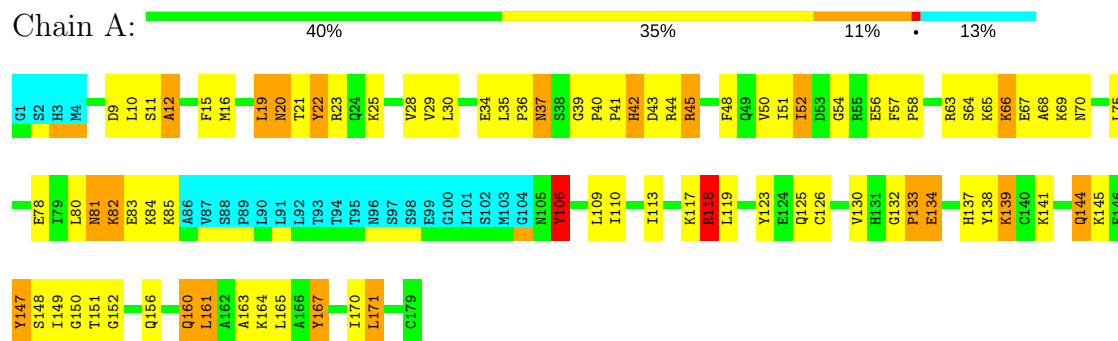
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



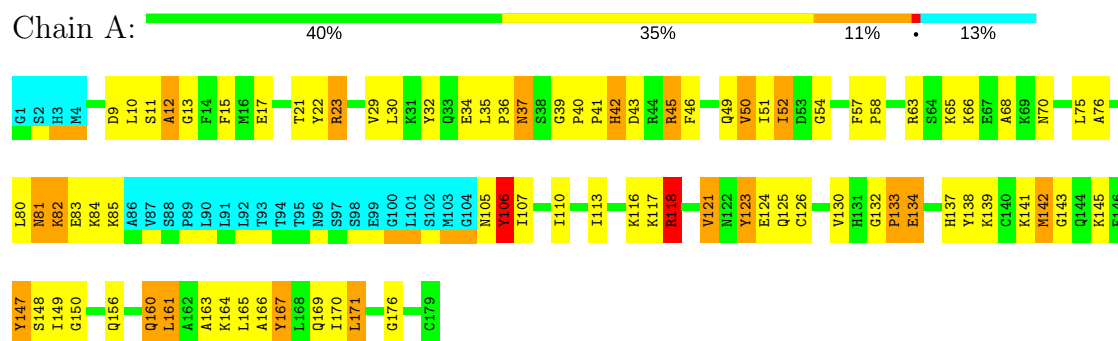
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



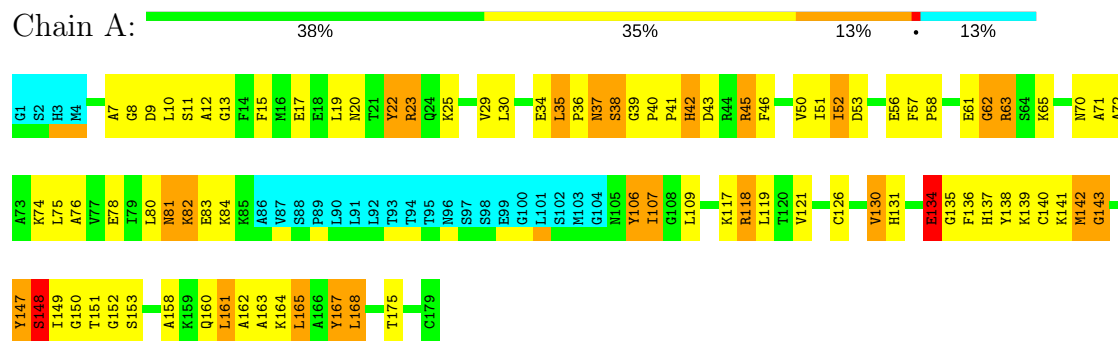
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



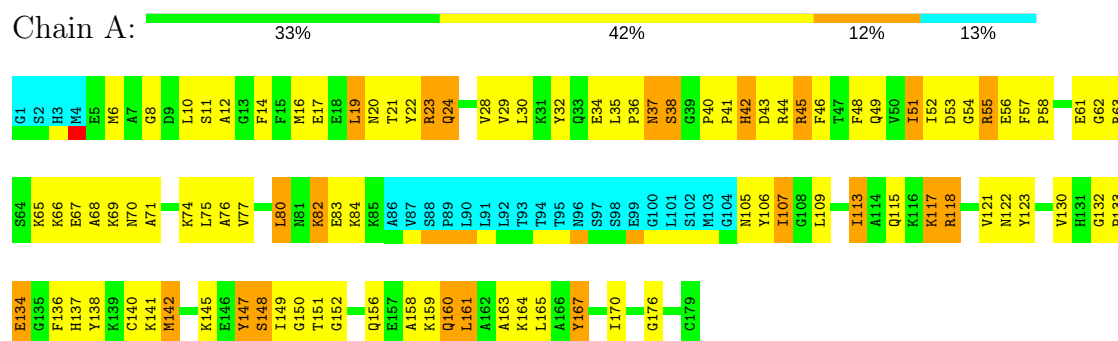
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



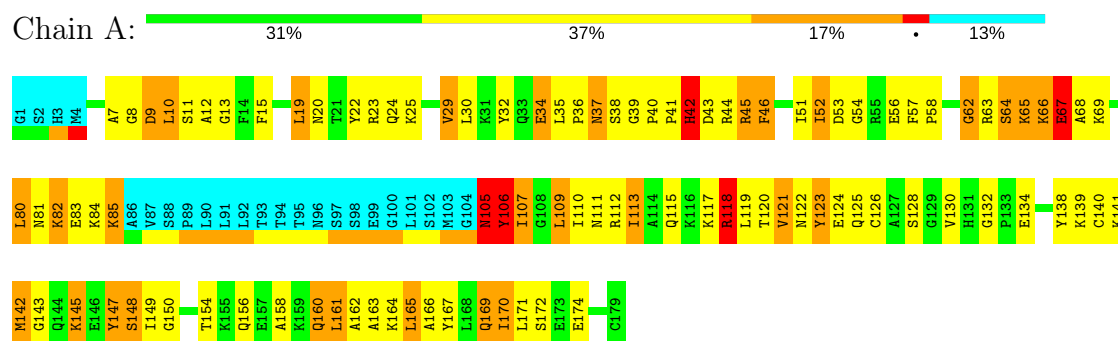
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



4.2.21 Score per residue for model 21 (medoid)

- Molecule 1: PROTEIN KINASE PKR



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *MODIFIED DG/SA PROTOCOL IN XPLOR*.

Of the 90 calculated structures, 21 were deposited, based on the following criterion: ?.

The following table shows the software used for structure solution, optimisation and refinement.

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	
NMRPIPE	structure solution	
PIPP	structure solution	

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in each chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1223	1226	1226	98±12
All	All	25683	25746	25746	2058

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 40.

All unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:PRO:O	1:A:42:HIS:ND1	0.93	2.02	21	5
1:A:80:LEU:H	1:A:80:LEU:HD22	0.89	1.25	5	1
1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:HD13	0.87	1.84	14	3
1:A:10:LEU:HD13	1:A:10:LEU:N	0.85	1.86	3	2
1:A:52:ILE:HD12	1:A:53:ASP:N	0.85	1.87	5	1
1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:HD23	0.84	1.87	5	1
1:A:161:LEU:O	1:A:161:LEU:HD12	0.84	1.73	2	10
1:A:130:VAL:HG13	1:A:131:HIS:H	0.83	1.31	19	1
1:A:161:LEU:HD12	1:A:161:LEU:O	0.82	1.74	10	11
1:A:52:ILE:HD12	1:A:53:ASP:H	0.82	1.31	5	1
1:A:30:LEU:HD22	1:A:32:TYR:CE2	0.82	2.09	2	2
1:A:142:MET:SD	1:A:143:GLY:N	0.81	2.54	21	8
1:A:34:GLU:O	1:A:35:LEU:HD23	0.80	1.77	8	8
1:A:80:LEU:HD22	1:A:80:LEU:N	0.80	1.92	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:CD2	1:A:30:LEU:HD11	0.79	2.08	8	2
1:A:10:LEU:HD23	1:A:10:LEU:N	0.78	1.93	13	7
1:A:43:ASP:O	1:A:45:ARG:N	0.78	2.15	10	21
1:A:22:TYR:CE2	1:A:80:LEU:HD11	0.78	2.14	18	4
1:A:80:LEU:H	1:A:80:LEU:HD23	0.77	1.37	14	4
1:A:29:VAL:N	1:A:52:ILE:O	0.77	2.16	21	21
1:A:23:ARG:O	1:A:28:VAL:HG22	0.77	1.80	5	4
1:A:30:LEU:HD22	1:A:32:TYR:CE1	0.76	2.15	8	10
1:A:151:THR:HG22	1:A:152:GLY:H	0.76	1.40	2	6
1:A:79:ILE:HD13	1:A:80:LEU:H	0.76	1.39	7	1
1:A:34:GLU:C	1:A:35:LEU:HD23	0.76	2.01	1	7
1:A:80:LEU:HD22	1:A:80:LEU:H	0.76	1.41	3	1
1:A:165:LEU:HD23	1:A:166:ALA:N	0.75	1.96	6	1
1:A:23:ARG:NH1	1:A:30:LEU:H	0.75	1.78	21	2
1:A:46:PHE:HB2	1:A:63:ARG:O	0.74	1.82	8	17
1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:HD23	0.74	1.97	19	9
1:A:79:ILE:HD13	1:A:80:LEU:N	0.74	1.97	7	1
1:A:23:ARG:HH11	1:A:30:LEU:HD21	0.74	1.42	20	3
1:A:39:GLY:N	1:A:45:ARG:HE	0.74	1.81	21	11
1:A:148:SER:CB	1:A:166:ALA:HB2	0.73	2.14	9	9
1:A:82:LYS:O	1:A:84:LYS:N	0.73	2.22	8	21
1:A:121:VAL:HG13	1:A:121:VAL:O	0.72	1.85	5	3
1:A:35:LEU:N	1:A:35:LEU:HD22	0.72	1.99	4	6
1:A:45:ARG:NH2	1:A:47:THR:N	0.72	2.38	14	1
1:A:165:LEU:HD13	1:A:166:ALA:N	0.71	1.99	8	2
1:A:22:TYR:CG	1:A:23:ARG:N	0.71	2.58	4	17
1:A:30:LEU:HD23	1:A:51:ILE:O	0.71	1.86	19	6
1:A:170:ILE:HD12	1:A:170:ILE:C	0.71	2.07	14	3
1:A:19:LEU:HD13	1:A:20:ASN:N	0.70	1.99	9	1
1:A:161:LEU:C	1:A:161:LEU:HD12	0.70	2.07	14	11
1:A:161:LEU:HD12	1:A:161:LEU:C	0.70	2.07	6	10
1:A:7:ALA:O	1:A:9:ASP:N	0.70	2.23	21	4
1:A:106:TYR:HB2	1:A:163:ALA:HB3	0.70	1.63	21	1
1:A:109:LEU:C	1:A:109:LEU:HD12	0.69	2.06	21	7
1:A:19:LEU:HD13	1:A:77:VAL:HG22	0.69	1.63	3	2
1:A:109:LEU:HD12	1:A:109:LEU:C	0.69	2.07	9	3
1:A:121:VAL:O	1:A:121:VAL:HG13	0.69	1.87	20	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:23:ARG:CZ	0.68	2.17	20	1
1:A:151:THR:HG22	1:A:152:GLY:N	0.68	2.03	2	9
1:A:170:ILE:C	1:A:170:ILE:HD12	0.68	2.09	8	3
1:A:106:TYR:CD1	1:A:106:TYR:N	0.68	2.61	3	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:ILE:HD12	1:A:163:ALA:HB2	0.68	1.64	6	5
1:A:22:TYR:CD1	1:A:22:TYR:C	0.68	2.67	9	9
1:A:11:SER:O	1:A:12:ALA:HB3	0.67	1.89	5	21
1:A:22:TYR:CD1	1:A:23:ARG:N	0.67	2.62	6	20
1:A:23:ARG:HH11	1:A:30:LEU:H	0.67	1.29	21	2
1:A:51:ILE:HG22	1:A:52:ILE:N	0.67	2.03	4	16
1:A:106:TYR:N	1:A:106:TYR:CD1	0.67	2.62	7	3
1:A:38:SER:N	1:A:45:ARG:HH11	0.67	1.86	14	2
1:A:57:PHE:N	1:A:58:PRO:CD	0.67	2.57	6	20
1:A:170:ILE:C	1:A:170:ILE:HD13	0.67	2.10	7	2
1:A:10:LEU:CD1	1:A:10:LEU:N	0.67	2.57	14	3
1:A:41:PRO:O	1:A:43:ASP:N	0.67	2.28	21	21
1:A:34:GLU:C	1:A:35:LEU:HD22	0.66	2.11	14	8
1:A:165:LEU:HD13	1:A:165:LEU:C	0.66	2.11	8	4
1:A:79:ILE:HD12	1:A:80:LEU:N	0.66	2.06	14	2
1:A:123:TYR:N	1:A:123:TYR:CD1	0.66	2.64	5	8
1:A:121:VAL:O	1:A:121:VAL:HG12	0.65	1.91	11	4
1:A:39:GLY:H	1:A:45:ARG:CZ	0.65	2.04	10	1
1:A:75:LEU:C	1:A:75:LEU:HD12	0.65	2.12	6	4
1:A:80:LEU:N	1:A:80:LEU:HD13	0.65	2.05	3	1
1:A:75:LEU:HD12	1:A:75:LEU:C	0.65	2.12	5	12
1:A:109:LEU:HD12	1:A:110:ILE:N	0.65	2.07	2	1
1:A:122:ASN:ND2	1:A:123:TYR:N	0.65	2.44	18	2
1:A:19:LEU:HD21	1:A:23:ARG:CZ	0.65	2.21	5	2
1:A:22:TYR:O	1:A:25:LYS:N	0.65	2.29	9	14
1:A:20:ASN:OD1	1:A:23:ARG:NE	0.65	2.30	21	4
1:A:23:ARG:HH22	1:A:76:ALA:HB1	0.65	1.51	20	2
1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CD2	0.65	2.60	21	7
1:A:39:GLY:H	1:A:45:ARG:NH1	0.65	1.89	10	1
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:HD13	0.65	2.12	4	10
1:A:85:LYS:H	1:A:85:LYS:CD	0.65	2.02	15	1
1:A:38:SER:N	1:A:45:ARG:NH1	0.64	2.45	14	1
1:A:22:TYR:C	1:A:22:TYR:CD1	0.64	2.70	3	12
1:A:43:ASP:O	1:A:45:ARG:NE	0.64	2.30	10	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:23:ARG:NH1	0.64	2.08	5	1
1:A:142:MET:SD	1:A:142:MET:N	0.64	2.71	11	4
1:A:123:TYR:CD1	1:A:123:TYR:N	0.63	2.67	2	7
1:A:19:LEU:C	1:A:19:LEU:HD13	0.63	2.12	9	1
1:A:20:ASN:ND2	1:A:23:ARG:NH2	0.63	2.46	12	1
1:A:51:ILE:CG2	1:A:52:ILE:N	0.63	2.61	5	21
1:A:57:PHE:N	1:A:58:PRO:HD3	0.63	2.07	3	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:170:ILE:HD13	1:A:171:LEU:N	0.63	2.09	7	2
1:A:23:ARG:NH1	1:A:30:LEU:HD21	0.63	2.08	3	1
1:A:43:ASP:O	1:A:45:ARG:CZ	0.63	2.47	10	1
1:A:51:ILE:HG22	1:A:52:ILE:H	0.63	1.53	4	2
1:A:11:SER:O	1:A:12:ALA:CB	0.62	2.46	1	20
1:A:82:LYS:C	1:A:84:LYS:H	0.62	1.98	21	21
1:A:143:GLY:O	1:A:145:LYS:N	0.62	2.32	18	3
1:A:123:TYR:CE2	1:A:140:CYS:SG	0.62	2.91	6	2
1:A:41:PRO:O	1:A:42:HIS:CG	0.62	2.51	3	20
1:A:10:LEU:H	1:A:10:LEU:HD23	0.62	1.55	18	9
1:A:80:LEU:HD13	1:A:80:LEU:N	0.62	2.10	5	1
1:A:43:ASP:OD1	1:A:43:ASP:N	0.62	2.33	2	1
1:A:29:VAL:O	1:A:52:ILE:O	0.61	2.18	1	21
1:A:170:ILE:HD12	1:A:171:LEU:N	0.61	2.10	9	6
1:A:80:LEU:HD13	1:A:80:LEU:H	0.61	1.53	3	1
1:A:45:ARG:HH11	1:A:45:ARG:CG	0.61	2.08	9	2
1:A:80:LEU:CD2	1:A:80:LEU:H	0.61	2.03	3	6
1:A:112:ARG:CG	1:A:112:ARG:HH11	0.61	2.08	3	2
1:A:10:LEU:HD23	1:A:10:LEU:H	0.61	1.54	5	6
1:A:35:LEU:N	1:A:35:LEU:CD2	0.61	2.63	4	5
1:A:24:GLN:NE2	1:A:24:GLN:N	0.61	2.49	20	1
1:A:138:TYR:O	1:A:150:GLY:O	0.60	2.19	21	21
1:A:35:LEU:CD2	1:A:35:LEU:N	0.60	2.65	18	3
1:A:113:ILE:HD12	1:A:170:ILE:CD1	0.60	2.26	21	6
1:A:10:LEU:CD2	1:A:10:LEU:N	0.60	2.64	18	9
1:A:134:GLU:OE1	1:A:135:GLY:N	0.60	2.35	4	2
1:A:45:ARG:CD	1:A:45:ARG:H	0.60	2.10	10	1
1:A:45:ARG:HH21	1:A:47:THR:N	0.60	1.94	14	1
1:A:46:PHE:N	1:A:63:ARG:O	0.60	2.32	18	1
1:A:45:ARG:CG	1:A:45:ARG:NH1	0.60	2.65	9	3
1:A:23:ARG:HE	1:A:30:LEU:H	0.60	1.40	17	3
1:A:121:VAL:CG1	1:A:121:VAL:O	0.60	2.49	21	3
1:A:75:LEU:C	1:A:75:LEU:HD13	0.60	2.17	16	1
1:A:9:ASP:OD2	1:A:13:GLY:O	0.59	2.20	21	1
1:A:45:ARG:CG	1:A:45:ARG:HH11	0.59	2.11	12	2
1:A:63:ARG:CG	1:A:63:ARG:HH11	0.59	2.10	9	2
1:A:120:THR:H	1:A:143:GLY:CA	0.59	2.10	2	1
1:A:82:LYS:C	1:A:84:LYS:N	0.59	2.54	21	21
1:A:105:ASN:OD1	1:A:105:ASN:N	0.59	2.36	2	1
1:A:7:ALA:C	1:A:9:ASP:H	0.59	2.01	21	1
1:A:45:ARG:H	1:A:45:ARG:NE	0.59	1.96	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:ILE:O	1:A:110:ILE:HG22	0.59	1.98	5	13
1:A:105:ASN:C	1:A:106:TYR:CG	0.59	2.75	21	9
1:A:165:LEU:HD23	1:A:165:LEU:C	0.59	2.18	6	1
1:A:33:GLN:NE2	1:A:33:GLN:N	0.59	2.50	3	1
1:A:109:LEU:O	1:A:109:LEU:HD12	0.58	1.97	12	6
1:A:46:PHE:CG	1:A:63:ARG:O	0.58	2.56	10	3
1:A:20:ASN:ND2	1:A:23:ARG:NH1	0.58	2.52	18	2
1:A:130:VAL:HG13	1:A:131:HIS:N	0.58	2.10	19	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:73:ALA:HB1	0.58	1.76	3	1
1:A:40:PRO:N	1:A:41:PRO:CD	0.58	2.66	5	21
1:A:55:ARG:CG	1:A:55:ARG:NH1	0.58	2.66	3	5
1:A:45:ARG:NH1	1:A:47:THR:OG1	0.58	2.36	12	8
1:A:145:LYS:O	1:A:145:LYS:CD	0.58	2.52	12	1
1:A:40:PRO:O	1:A:42:HIS:N	0.58	2.35	20	21
1:A:45:ARG:NH2	1:A:47:THR:H	0.58	1.95	14	1
1:A:39:GLY:CA	1:A:45:ARG:HE	0.58	2.11	9	4
1:A:166:ALA:O	1:A:169:GLN:N	0.58	2.37	13	11
1:A:38:SER:CB	1:A:45:ARG:HH12	0.57	2.12	8	4
1:A:147:TYR:O	1:A:149:ILE:N	0.57	2.37	12	14
1:A:85:LYS:CD	1:A:85:LYS:N	0.57	2.67	7	5
1:A:145:LYS:N	1:A:145:LYS:CD	0.57	2.67	9	2
1:A:122:ASN:OD1	1:A:123:TYR:N	0.57	2.37	21	3
1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CD1	0.57	2.59	3	2
1:A:23:ARG:NH1	1:A:30:LEU:HB2	0.57	2.15	21	1
1:A:55:ARG:HH11	1:A:55:ARG:HG2	0.57	1.59	3	2
1:A:44:ARG:CG	1:A:44:ARG:HH11	0.57	2.12	4	2
1:A:39:GLY:N	1:A:45:ARG:CZ	0.57	2.67	8	3
1:A:62:GLY:O	1:A:63:ARG:CB	0.57	2.52	1	8
1:A:132:GLY:C	1:A:134:GLU:H	0.57	2.01	18	7
1:A:163:ALA:O	1:A:167:TYR:N	0.57	2.37	21	7
1:A:9:ASP:CG	1:A:10:LEU:N	0.57	2.57	21	2
1:A:20:ASN:ND2	1:A:23:ARG:NE	0.57	2.53	12	1
1:A:80:LEU:CD1	1:A:80:LEU:H	0.57	2.11	3	1
1:A:56:GLU:CD	1:A:56:GLU:H	0.57	2.00	13	1
1:A:85:LYS:N	1:A:85:LYS:CD	0.57	2.68	13	1
1:A:44:ARG:NH1	1:A:44:ARG:CG	0.57	2.67	4	2
1:A:22:TYR:CZ	1:A:80:LEU:HD13	0.57	2.35	7	1
1:A:55:ARG:HH11	1:A:55:ARG:CG	0.57	2.12	3	2
1:A:142:MET:SD	1:A:142:MET:O	0.57	2.63	19	1
1:A:56:GLU:CD	1:A:56:GLU:N	0.56	2.58	13	2
1:A:119:LEU:CD2	1:A:144:GLN:NE2	0.56	2.68	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:SER:H	1:A:45:ARG:HH11	0.56	1.43	10	1
1:A:39:GLY:O	1:A:45:ARG:NH2	0.56	2.37	10	1
1:A:118:ARG:HH11	1:A:118:ARG:CG	0.56	2.13	6	2
1:A:112:ARG:CG	1:A:112:ARG:NH1	0.56	2.64	3	3
1:A:9:ASP:C	1:A:10:LEU:HD13	0.56	2.21	3	5
1:A:45:ARG:NH2	1:A:47:THR:CB	0.56	2.69	14	1
1:A:40:PRO:N	1:A:41:PRO:HD2	0.56	2.15	9	21
1:A:20:ASN:HD22	1:A:23:ARG:CZ	0.56	2.13	12	1
1:A:53:ASP:OD1	1:A:54:GLY:N	0.56	2.37	18	4
1:A:30:LEU:CD2	1:A:30:LEU:N	0.56	2.57	5	1
1:A:107:ILE:HD11	1:A:159:LYS:O	0.56	2.01	18	5
1:A:138:TYR:CG	1:A:158:ALA:HB1	0.56	2.36	13	8
1:A:36:PRO:O	1:A:37:ASN:O	0.56	2.23	3	14
1:A:20:ASN:ND2	1:A:20:ASN:O	0.56	2.39	5	3
1:A:63:ARG:CG	1:A:63:ARG:NH1	0.55	2.66	9	2
1:A:122:ASN:ND2	1:A:123:TYR:H	0.55	1.98	5	3
1:A:45:ARG:HH21	1:A:47:THR:CB	0.55	2.13	14	1
1:A:37:ASN:ND2	1:A:37:ASN:O	0.55	2.40	17	6
1:A:67:GLU:O	1:A:71:ALA:HB2	0.55	2.00	13	6
1:A:44:ARG:HH11	1:A:44:ARG:CG	0.55	2.13	13	1
1:A:78:GLU:O	1:A:81:ASN:ND2	0.55	2.39	2	7
1:A:19:LEU:HD22	1:A:19:LEU:O	0.55	2.01	9	2
1:A:20:ASN:ND2	1:A:23:ARG:HH21	0.55	1.99	12	1
1:A:56:GLU:OE2	1:A:56:GLU:N	0.55	2.35	13	1
1:A:41:PRO:O	1:A:42:HIS:CD2	0.55	2.59	1	6
1:A:106:TYR:CD2	1:A:107:ILE:N	0.55	2.72	19	2
1:A:121:VAL:O	1:A:121:VAL:CG1	0.55	2.54	8	6
1:A:75:LEU:HD12	1:A:76:ALA:N	0.55	2.16	1	16
1:A:26:GLN:OE1	1:A:26:GLN:N	0.55	2.39	11	1
1:A:64:SER:O	1:A:64:SER:OG	0.55	2.22	21	2
1:A:63:ARG:NH1	1:A:63:ARG:CG	0.55	2.68	5	1
1:A:66:LYS:O	1:A:68:ALA:N	0.55	2.40	21	12
1:A:20:ASN:OD1	1:A:23:ARG:NH2	0.55	2.39	11	2
1:A:147:TYR:O	1:A:149:ILE:HD12	0.55	2.02	7	4
1:A:29:VAL:CG1	1:A:53:ASP:O	0.55	2.55	1	1
1:A:63:ARG:HH11	1:A:63:ARG:CG	0.54	2.14	5	1
1:A:33:GLN:NE2	1:A:34:GLU:H	0.54	2.01	8	1
1:A:53:ASP:OD1	1:A:53:ASP:N	0.54	2.40	14	2
1:A:20:ASN:HD21	1:A:24:GLN:CD	0.54	2.05	5	1
1:A:79:ILE:HD12	1:A:79:ILE:C	0.54	2.23	14	1
1:A:64:SER:O	1:A:65:LYS:CG	0.54	2.55	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:ARG:NH1	1:A:118:ARG:CG	0.54	2.67	6	2
1:A:44:ARG:CG	1:A:44:ARG:NH1	0.54	2.68	13	1
1:A:148:SER:OG	1:A:166:ALA:HB2	0.54	2.03	9	4
1:A:37:ASN:O	1:A:37:ASN:ND2	0.54	2.41	19	3
1:A:136:PHE:CE1	1:A:153:SER:O	0.54	2.61	5	1
1:A:145:LYS:H	1:A:145:LYS:CD	0.54	2.16	14	1
1:A:18:GLU:N	1:A:18:GLU:OE1	0.54	2.41	8	1
1:A:56:GLU:O	1:A:57:PHE:CG	0.54	2.61	2	14
1:A:122:ASN:HD22	1:A:141:LYS:NZ	0.54	2.00	2	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:30:LEU:HD11	0.54	1.80	21	3
1:A:106:TYR:OH	1:A:160:GLN:NE2	0.54	2.41	5	1
1:A:20:ASN:ND2	1:A:24:GLN:OE1	0.54	2.40	20	2
1:A:136:PHE:CE2	1:A:155:LYS:NZ	0.54	2.73	1	1
1:A:173:GLU:N	1:A:173:GLU:CD	0.54	2.61	10	1
1:A:134:GLU:N	1:A:134:GLU:OE2	0.53	2.40	8	1
1:A:55:ARG:CG	1:A:55:ARG:HH11	0.53	2.15	11	3
1:A:21:THR:CG2	1:A:22:TYR:N	0.53	2.71	15	1
1:A:132:GLY:O	1:A:134:GLU:N	0.53	2.41	18	4
1:A:161:LEU:CD1	1:A:161:LEU:C	0.53	2.76	11	11
1:A:19:LEU:O	1:A:19:LEU:HD23	0.53	2.03	18	3
1:A:39:GLY:N	1:A:45:ARG:NE	0.53	2.56	9	6
1:A:58:PRO:O	1:A:59:GLU:CG	0.53	2.57	18	1
1:A:79:ILE:CD1	1:A:80:LEU:N	0.53	2.71	14	3
1:A:19:LEU:HD22	1:A:30:LEU:HD11	0.53	1.80	18	5
1:A:45:ARG:NH1	1:A:45:ARG:CG	0.53	2.71	11	1
1:A:6:MET:O	1:A:6:MET:CG	0.53	2.56	1	1
1:A:125:GLN:N	1:A:139:LYS:HZ3	0.53	2.01	16	1
1:A:33:GLN:NE2	1:A:34:GLU:N	0.53	2.56	8	2
1:A:118:ARG:O	1:A:119:LEU:HD23	0.53	2.03	21	3
1:A:120:THR:H	1:A:143:GLY:N	0.53	2.01	2	1
1:A:125:GLN:C	1:A:139:LYS:NZ	0.53	2.62	16	1
1:A:45:ARG:C	1:A:45:ARG:CD	0.52	2.78	21	7
1:A:136:PHE:O	1:A:151:THR:HG23	0.52	2.04	13	1
1:A:55:ARG:HG2	1:A:55:ARG:HH11	0.52	1.64	9	3
1:A:158:ALA:O	1:A:162:ALA:N	0.52	2.39	19	5
1:A:136:PHE:CD1	1:A:153:SER:O	0.52	2.63	5	3
1:A:105:ASN:O	1:A:106:TYR:CD2	0.52	2.61	21	2
1:A:118:ARG:O	1:A:118:ARG:HG2	0.52	2.04	21	1
1:A:45:ARG:CZ	1:A:47:THR:OG1	0.52	2.57	8	3
1:A:22:TYR:CZ	1:A:80:LEU:HD11	0.52	2.39	2	4
1:A:55:ARG:NH1	1:A:55:ARG:CG	0.52	2.69	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:GLU:CD	1:A:135:GLY:N	0.52	2.63	2	3
1:A:28:VAL:HG21	1:A:52:ILE:HG22	0.52	1.81	1	1
1:A:23:ARG:NE	1:A:30:LEU:CD1	0.52	2.72	6	1
1:A:56:GLU:H	1:A:56:GLU:CD	0.52	2.07	1	1
1:A:121:VAL:O	1:A:121:VAL:HG23	0.52	2.05	19	1
1:A:134:GLU:OE1	1:A:134:GLU:N	0.52	2.42	4	1
1:A:142:MET:CB	1:A:166:ALA:HB1	0.52	2.35	1	3
1:A:159:LYS:CB	1:A:159:LYS:NZ	0.52	2.72	15	1
1:A:124:GLU:CG	1:A:125:GLN:N	0.52	2.72	5	3
1:A:112:ARG:HH11	1:A:112:ARG:CG	0.52	2.17	15	1
1:A:22:TYR:CE2	1:A:80:LEU:HD13	0.51	2.39	7	1
1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:CD	0.51	2.05	7	4
1:A:141:LYS:CD	1:A:141:LYS:O	0.51	2.58	8	1
1:A:46:PHE:CB	1:A:63:ARG:O	0.51	2.59	14	1
1:A:35:LEU:HD23	1:A:49:GLN:OE1	0.51	2.05	4	1
1:A:29:VAL:CG2	1:A:53:ASP:O	0.51	2.58	4	4
1:A:41:PRO:C	1:A:42:HIS:CG	0.51	2.84	5	9
1:A:133:PRO:O	1:A:134:GLU:O	0.51	2.29	18	9
1:A:45:ARG:NH2	1:A:47:THR:OG1	0.51	2.42	14	1
1:A:5:GLU:O	1:A:6:MET:SD	0.51	2.69	9	1
1:A:151:THR:CG2	1:A:152:GLY:N	0.51	2.73	9	8
1:A:66:LYS:C	1:A:68:ALA:N	0.51	2.64	2	12
1:A:22:TYR:O	1:A:26:GLN:OE1	0.51	2.29	11	1
1:A:42:HIS:C	1:A:42:HIS:HD1	0.51	2.09	21	1
1:A:77:VAL:O	1:A:80:LEU:CD2	0.51	2.59	3	1
1:A:119:LEU:HD22	1:A:143:GLY:HA2	0.51	1.83	11	2
1:A:107:ILE:HD13	1:A:163:ALA:HB2	0.51	1.80	11	1
1:A:18:GLU:CD	1:A:19:LEU:N	0.51	2.63	5	1
1:A:23:ARG:CZ	1:A:23:ARG:CB	0.51	2.88	6	1
1:A:53:ASP:C	1:A:53:ASP:OD1	0.51	2.48	21	1
1:A:144:GLN:NE2	1:A:144:GLN:H	0.51	2.03	16	1
1:A:9:ASP:OD1	1:A:9:ASP:N	0.51	2.42	7	2
1:A:43:ASP:C	1:A:45:ARG:NH2	0.51	2.64	10	1
1:A:167:TYR:C	1:A:167:TYR:CD1	0.50	2.84	14	10
1:A:151:THR:CG2	1:A:152:GLY:H	0.50	2.17	2	6
1:A:77:VAL:O	1:A:81:ASN:ND2	0.50	2.44	1	5
1:A:20:ASN:ND2	1:A:23:ARG:CZ	0.50	2.74	12	1
1:A:67:GLU:O	1:A:71:ALA:CB	0.50	2.60	13	5
1:A:110:ILE:HG23	1:A:111:ASN:N	0.50	2.21	21	1
1:A:61:GLU:N	1:A:61:GLU:CD	0.50	2.65	19	1
1:A:121:VAL:HG22	1:A:123:TYR:OH	0.50	2.07	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:ASN:N	1:A:81:ASN:HD22	0.50	2.04	17	3
1:A:145:LYS:CG	1:A:145:LYS:O	0.50	2.59	12	1
1:A:170:ILE:C	1:A:170:ILE:CD1	0.50	2.80	10	4
1:A:45:ARG:NH1	1:A:45:ARG:HG2	0.50	2.21	3	3
1:A:56:GLU:O	1:A:57:PHE:CD1	0.50	2.64	5	2
1:A:61:GLU:N	1:A:61:GLU:OE1	0.50	2.44	4	1
1:A:41:PRO:C	1:A:43:ASP:H	0.50	2.09	6	5
1:A:23:ARG:HD3	1:A:30:LEU:HD22	0.50	1.82	5	1
1:A:45:ARG:CD	1:A:45:ARG:N	0.50	2.74	10	1
1:A:121:VAL:CG1	1:A:123:TYR:OH	0.50	2.60	13	3
1:A:49:GLN:NE2	1:A:58:PRO:O	0.50	2.44	12	1
1:A:50:VAL:O	1:A:50:VAL:HG13	0.50	2.06	5	3
1:A:22:TYR:OH	1:A:23:ARG:NE	0.50	2.45	20	1
1:A:161:LEU:C	1:A:161:LEU:CD1	0.50	2.77	13	7
1:A:136:PHE:CD1	1:A:136:PHE:N	0.50	2.80	5	5
1:A:45:ARG:H	1:A:45:ARG:HD2	0.50	1.67	9	5
1:A:41:PRO:C	1:A:43:ASP:N	0.50	2.64	21	19
1:A:22:TYR:CD2	1:A:80:LEU:HD11	0.50	2.41	9	2
1:A:32:TYR:CE2	1:A:50:VAL:CG1	0.50	2.95	17	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:11:SER:N	0.49	2.22	7	2
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:HD22	0.49	2.28	10	3
1:A:109:LEU:HD12	1:A:109:LEU:O	0.49	2.06	9	1
1:A:9:ASP:N	1:A:9:ASP:OD1	0.49	2.44	14	2
1:A:169:GLN:O	1:A:173:GLU:OE2	0.49	2.30	10	1
1:A:139:LYS:HB3	1:A:149:ILE:HG23	0.49	1.83	12	1
1:A:79:ILE:CG1	1:A:80:LEU:N	0.49	2.75	14	2
1:A:167:TYR:CD1	1:A:167:TYR:C	0.49	2.85	20	9
1:A:70:ASN:O	1:A:74:LYS:CG	0.49	2.60	12	1
1:A:63:ARG:CD	1:A:64:SER:H	0.49	2.21	5	1
1:A:120:THR:H	1:A:143:GLY:HA3	0.49	1.66	2	1
1:A:126:CYS:O	1:A:137:HIS:O	0.49	2.30	15	14
1:A:23:ARG:HH11	1:A:30:LEU:N	0.49	2.00	21	1
1:A:160:GLN:CG	1:A:161:LEU:N	0.49	2.75	18	1
1:A:38:SER:C	1:A:45:ARG:HE	0.49	2.11	21	2
1:A:41:PRO:C	1:A:42:HIS:CD2	0.49	2.85	5	3
1:A:110:ILE:CG2	1:A:123:TYR:OH	0.49	2.61	17	5
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:CD2	0.49	2.80	10	2
1:A:168:LEU:CD2	1:A:168:LEU:N	0.49	2.75	1	2
1:A:117:LYS:O	1:A:118:ARG:O	0.49	2.31	9	18
1:A:109:LEU:CD1	1:A:109:LEU:C	0.49	2.78	9	3
1:A:130:VAL:CG1	1:A:131:HIS:H	0.49	2.13	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:ALA:O	1:A:77:VAL:HG23	0.49	2.07	15	1
1:A:48:PHE:CD2	1:A:72:ALA:HB2	0.49	2.42	13	1
1:A:7:ALA:C	1:A:9:ASP:N	0.49	2.65	21	1
1:A:64:SER:O	1:A:65:LYS:CB	0.49	2.61	13	5
1:A:81:ASN:OD1	1:A:81:ASN:C	0.49	2.50	12	2
1:A:55:ARG:NH1	1:A:55:ARG:HG3	0.49	2.23	1	1
1:A:62:GLY:O	1:A:67:GLU:OE2	0.49	2.31	8	3
1:A:55:ARG:O	1:A:57:PHE:CE2	0.49	2.66	11	1
1:A:168:LEU:N	1:A:168:LEU:CD2	0.49	2.76	19	1
1:A:132:GLY:O	1:A:134:GLU:OE1	0.49	2.30	4	1
1:A:56:GLU:O	1:A:57:PHE:CD2	0.48	2.65	16	6
1:A:17:GLU:O	1:A:21:THR:OG1	0.48	2.30	8	8
1:A:10:LEU:CD2	1:A:10:LEU:C	0.48	2.82	3	3
1:A:170:ILE:CD1	1:A:170:ILE:C	0.48	2.82	8	2
1:A:105:ASN:C	1:A:106:TYR:CD2	0.48	2.87	10	4
1:A:122:ASN:O	1:A:140:CYS:SG	0.48	2.71	20	3
1:A:56:GLU:N	1:A:56:GLU:CD	0.48	2.66	1	1
1:A:163:ALA:O	1:A:164:LYS:C	0.48	2.50	21	21
1:A:142:MET:SD	1:A:170:ILE:HG21	0.48	2.48	9	2
1:A:80:LEU:HD23	1:A:80:LEU:H	0.48	1.68	21	2
1:A:137:HIS:CD2	1:A:137:HIS:C	0.48	2.86	1	5
1:A:106:TYR:CD1	1:A:107:ILE:N	0.48	2.81	6	1
1:A:117:LYS:CG	1:A:119:LEU:HD11	0.48	2.38	15	1
1:A:38:SER:CB	1:A:45:ARG:NH1	0.48	2.76	14	5
1:A:16:MET:O	1:A:20:ASN:CB	0.48	2.62	2	4
1:A:123:TYR:CE1	1:A:140:CYS:SG	0.48	3.04	7	2
1:A:22:TYR:OH	1:A:23:ARG:NH2	0.48	2.45	20	1
1:A:132:GLY:C	1:A:134:GLU:N	0.48	2.66	18	6
1:A:109:LEU:C	1:A:109:LEU:CD1	0.48	2.78	12	7
1:A:31:LYS:NZ	1:A:53:ASP:O	0.48	2.47	3	1
1:A:80:LEU:H	1:A:80:LEU:CD2	0.48	2.17	8	3
1:A:142:MET:SD	1:A:142:MET:C	0.48	2.93	20	2
1:A:51:ILE:HG23	1:A:52:ILE:N	0.48	2.24	2	5
1:A:64:SER:O	1:A:65:LYS:HB3	0.48	2.09	21	2
1:A:110:ILE:CG2	1:A:111:ASN:N	0.48	2.77	21	5
1:A:56:GLU:O	1:A:56:GLU:OE1	0.48	2.32	13	1
1:A:62:GLY:O	1:A:63:ARG:O	0.48	2.31	15	3
1:A:34:GLU:N	1:A:34:GLU:CD	0.48	2.67	2	1
1:A:106:TYR:C	1:A:108:GLY:N	0.47	2.67	8	6
1:A:46:PHE:O	1:A:61:GLU:CB	0.47	2.62	3	2
1:A:141:LYS:CD	1:A:141:LYS:C	0.47	2.82	13	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:LYS:CB	1:A:149:ILE:HG23	0.47	2.39	12	1
1:A:23:ARG:NE	1:A:30:LEU:HD12	0.47	2.24	6	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:30:LEU:HD11	0.47	1.86	8	1
1:A:70:ASN:O	1:A:74:LYS:CB	0.47	2.62	5	8
1:A:70:ASN:O	1:A:74:LYS:N	0.47	2.41	12	6
1:A:62:GLY:O	1:A:67:GLU:CG	0.47	2.62	13	2
1:A:142:MET:O	1:A:142:MET:SD	0.47	2.72	20	2
1:A:142:MET:C	1:A:142:MET:SD	0.47	2.92	14	1
1:A:119:LEU:HD22	1:A:144:GLN:H	0.47	1.70	15	1
1:A:113:ILE:HD13	1:A:113:ILE:N	0.47	2.24	13	2
1:A:79:ILE:HG13	1:A:80:LEU:N	0.47	2.25	13	1
1:A:37:ASN:O	1:A:37:ASN:OD1	0.47	2.32	9	2
1:A:46:PHE:HB2	1:A:63:ARG:C	0.47	2.30	9	3
1:A:23:ARG:HH22	1:A:76:ALA:CB	0.47	2.23	20	1
1:A:142:MET:HB3	1:A:166:ALA:HB1	0.47	1.87	1	3
1:A:111:ASN:OD1	1:A:121:VAL:HG11	0.47	2.10	2	1
1:A:134:GLU:OE2	1:A:134:GLU:N	0.47	2.48	9	1
1:A:23:ARG:CZ	1:A:52:ILE:CG2	0.47	2.92	7	1
1:A:156:GLN:O	1:A:160:GLN:CG	0.47	2.63	4	9
1:A:9:ASP:OD2	1:A:13:GLY:N	0.47	2.47	19	1
1:A:39:GLY:CA	1:A:45:ARG:NH1	0.47	2.78	6	1
1:A:45:ARG:NH1	1:A:61:GLU:OE1	0.47	2.48	2	1
1:A:144:GLN:HE21	1:A:144:GLN:H	0.47	1.50	16	1
1:A:51:ILE:HG12	1:A:56:GLU:O	0.47	2.09	21	1
1:A:20:ASN:C	1:A:20:ASN:ND2	0.47	2.67	5	1
1:A:20:ASN:HD22	1:A:23:ARG:NE	0.47	2.08	12	1
1:A:34:GLU:N	1:A:34:GLU:OE1	0.47	2.41	17	1
1:A:117:LYS:HG3	1:A:119:LEU:HD11	0.46	1.86	8	2
1:A:36:PRO:O	1:A:37:ASN:C	0.46	2.54	21	11
1:A:106:TYR:CG	1:A:107:ILE:N	0.46	2.83	19	2
1:A:112:ARG:HG2	1:A:112:ARG:HH11	0.46	1.68	3	2
1:A:65:LYS:CB	1:A:65:LYS:NZ	0.46	2.77	2	1
1:A:75:LEU:C	1:A:75:LEU:CD1	0.46	2.83	6	6
1:A:132:GLY:H	1:A:133:PRO:HD2	0.46	1.70	3	2
1:A:56:GLU:C	1:A:57:PHE:CD1	0.46	2.88	5	2
1:A:56:GLU:N	1:A:56:GLU:OE1	0.46	2.42	1	1
1:A:19:LEU:O	1:A:22:TYR:CE2	0.46	2.69	6	1
1:A:29:VAL:O	1:A:52:ILE:C	0.46	2.54	21	2
1:A:142:MET:N	1:A:142:MET:SD	0.46	2.89	12	1
1:A:20:ASN:OD1	1:A:20:ASN:O	0.46	2.34	19	2
1:A:19:LEU:HD22	1:A:19:LEU:C	0.46	2.30	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:NH1	0.46	2.26	4	2
1:A:23:ARG:CZ	1:A:52:ILE:HG22	0.46	2.41	5	1
1:A:25:LYS:C	1:A:26:GLN:OE1	0.46	2.54	1	1
1:A:107:ILE:CG1	1:A:163:ALA:HB2	0.46	2.40	13	1
1:A:142:MET:O	1:A:143:GLY:O	0.46	2.33	19	1
1:A:23:ARG:NH1	1:A:23:ARG:CG	0.46	2.77	1	1
1:A:33:GLN:N	1:A:33:GLN:CD	0.46	2.69	3	1
1:A:20:ASN:HD21	1:A:23:ARG:NH1	0.46	2.09	8	1
1:A:50:VAL:HG13	1:A:50:VAL:O	0.46	2.11	12	3
1:A:120:THR:HG22	1:A:143:GLY:CA	0.46	2.41	12	1
1:A:32:TYR:CE1	1:A:50:VAL:HG21	0.46	2.46	5	1
1:A:120:THR:OG1	1:A:143:GLY:N	0.46	2.49	2	1
1:A:23:ARG:CG	1:A:24:GLN:N	0.46	2.78	21	1
1:A:128:SER:OG	1:A:135:GLY:O	0.46	2.25	5	1
1:A:64:SER:O	1:A:65:LYS:HG2	0.46	2.11	4	1
1:A:105:ASN:O	1:A:106:TYR:CG	0.46	2.68	21	1
1:A:66:LYS:O	1:A:67:GLU:C	0.46	2.53	10	6
1:A:45:ARG:HD3	1:A:45:ARG:N	0.46	2.26	14	1
1:A:34:GLU:CD	1:A:34:GLU:H	0.46	2.14	19	1
1:A:19:LEU:C	1:A:19:LEU:HD23	0.45	2.32	18	1
1:A:42:HIS:ND1	1:A:42:HIS:C	0.45	2.67	21	3
1:A:6:MET:O	1:A:8:GLY:N	0.45	2.49	20	1
1:A:119:LEU:CD2	1:A:144:GLN:OE1	0.45	2.64	16	1
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:CD1	0.45	2.85	14	12
1:A:140:CYS:O	1:A:148:SER:O	0.45	2.34	19	5
1:A:36:PRO:C	1:A:37:ASN:ND2	0.45	2.69	2	1
1:A:63:ARG:HH11	1:A:63:ARG:HG3	0.45	1.71	4	1
1:A:45:ARG:HD2	1:A:45:ARG:N	0.45	2.26	10	2
1:A:61:GLU:CD	1:A:61:GLU:N	0.45	2.70	12	3
1:A:20:ASN:HD21	1:A:23:ARG:HH21	0.45	1.53	12	1
1:A:118:ARG:N	1:A:118:ARG:CD	0.45	2.80	14	1
1:A:23:ARG:CG	1:A:23:ARG:NH1	0.45	2.79	17	1
1:A:118:ARG:CD	1:A:118:ARG:O	0.45	2.65	8	3
1:A:14:PHE:O	1:A:18:GLU:OE2	0.45	2.34	8	1
1:A:41:PRO:O	1:A:43:ASP:OD1	0.45	2.35	18	8
1:A:75:LEU:CD1	1:A:75:LEU:C	0.45	2.84	3	5
1:A:10:LEU:HD22	1:A:10:LEU:C	0.45	2.32	3	1
1:A:141:LYS:C	1:A:141:LYS:CD	0.45	2.85	4	1
1:A:39:GLY:N	1:A:45:ARG:NH1	0.45	2.62	10	1
1:A:43:ASP:O	1:A:45:ARG:HG3	0.45	2.12	8	1
1:A:52:ILE:HD11	1:A:56:GLU:HG2	0.45	1.88	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:C	1:A:19:LEU:HD22	0.45	2.32	9	1
1:A:51:ILE:CG2	1:A:52:ILE:H	0.45	2.22	4	5
1:A:80:LEU:O	1:A:81:ASN:C	0.45	2.54	1	3
1:A:80:LEU:HD23	1:A:80:LEU:N	0.45	2.27	10	3
1:A:122:ASN:C	1:A:123:TYR:CD1	0.45	2.90	11	1
1:A:37:ASN:OD1	1:A:37:ASN:O	0.45	2.34	6	1
1:A:44:ARG:HH11	1:A:44:ARG:HG3	0.45	1.71	3	1
1:A:16:MET:SD	1:A:16:MET:C	0.45	2.95	15	1
1:A:148:SER:OG	1:A:165:LEU:CD1	0.45	2.65	4	1
1:A:42:HIS:O	1:A:42:HIS:ND1	0.45	2.49	8	1
1:A:63:ARG:HG3	1:A:63:ARG:HH11	0.45	1.71	8	1
1:A:156:GLN:O	1:A:160:GLN:OE1	0.45	2.35	18	1
1:A:41:PRO:O	1:A:42:HIS:C	0.45	2.55	21	4
1:A:121:VAL:HG12	1:A:121:VAL:O	0.45	2.12	9	3
1:A:16:MET:C	1:A:16:MET:SD	0.45	2.96	16	2
1:A:39:GLY:O	1:A:43:ASP:OD1	0.45	2.35	2	1
1:A:144:GLN:NE2	1:A:144:GLN:N	0.45	2.65	16	1
1:A:20:ASN:O	1:A:23:ARG:CG	0.45	2.64	4	1
1:A:117:LYS:O	1:A:118:ARG:C	0.45	2.55	9	15
1:A:111:ASN:HA	1:A:121:VAL:HG21	0.45	1.88	6	2
1:A:24:GLN:HE21	1:A:24:GLN:N	0.45	2.10	20	1
1:A:116:LYS:CD	1:A:116:LYS:C	0.44	2.86	10	2
1:A:165:LEU:CD1	1:A:165:LEU:C	0.44	2.86	16	4
1:A:20:ASN:ND2	1:A:23:ARG:HE	0.44	2.09	12	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:72:ALA:HB1	0.44	1.89	19	1
1:A:23:ARG:CZ	1:A:23:ARG:HB2	0.44	2.41	6	1
1:A:32:TYR:CE1	1:A:50:VAL:CG2	0.44	3.00	5	2
1:A:69:LYS:CG	1:A:70:ASN:N	0.44	2.81	20	1
1:A:32:TYR:OH	1:A:73:ALA:HB2	0.44	2.12	11	1
1:A:23:ARG:HH11	1:A:23:ARG:HG2	0.44	1.72	1	1
1:A:142:MET:HG2	1:A:143:GLY:N	0.44	2.28	3	1
1:A:31:LYS:NZ	1:A:53:ASP:C	0.44	2.71	3	1
1:A:44:ARG:HG2	1:A:44:ARG:NH1	0.44	2.28	18	1
1:A:19:LEU:O	1:A:23:ARG:CG	0.44	2.65	5	2
1:A:34:GLU:N	1:A:34:GLU:OE2	0.44	2.51	2	1
1:A:105:ASN:OD1	1:A:105:ASN:O	0.44	2.35	9	1
1:A:22:TYR:OH	1:A:80:LEU:HD21	0.44	2.13	20	1
1:A:167:TYR:CD2	1:A:168:LEU:CD2	0.44	3.01	19	1
1:A:163:ALA:O	1:A:165:LEU:N	0.44	2.51	3	1
1:A:64:SER:C	1:A:65:LYS:CG	0.44	2.86	9	2
1:A:23:ARG:HE	1:A:30:LEU:N	0.44	2.08	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:166:ALA:O	1:A:167:TYR:C	0.44	2.56	18	6
1:A:179:CYS:SG	1:A:179:CYS:O	0.44	2.75	13	1
1:A:12:ALA:O	1:A:13:GLY:O	0.44	2.35	9	1
1:A:113:ILE:HD12	1:A:170:ILE:HD12	0.44	1.88	12	1
1:A:77:VAL:O	1:A:80:LEU:HD22	0.44	2.13	3	1
1:A:48:PHE:CZ	1:A:71:ALA:HB3	0.43	2.48	13	1
1:A:137:HIS:C	1:A:137:HIS:CD2	0.43	2.91	10	6
1:A:19:LEU:HD11	1:A:23:ARG:NH1	0.43	2.28	20	1
1:A:33:GLN:OE1	1:A:49:GLN:NE2	0.43	2.50	15	1
1:A:63:ARG:HH11	1:A:63:ARG:HG2	0.43	1.73	5	1
1:A:134:GLU:N	1:A:134:GLU:CD	0.43	2.71	8	2
1:A:9:ASP:OD1	1:A:13:GLY:O	0.43	2.35	8	1
1:A:107:ILE:HG13	1:A:163:ALA:HB2	0.43	1.90	13	1
1:A:122:ASN:HD22	1:A:123:TYR:N	0.43	2.10	5	1
1:A:80:LEU:N	1:A:80:LEU:HD23	0.43	2.18	14	1
1:A:32:TYR:CD2	1:A:50:VAL:CG1	0.43	3.02	17	2
1:A:63:ARG:HG3	1:A:63:ARG:NH1	0.43	2.29	8	2
1:A:41:PRO:C	1:A:42:HIS:ND1	0.43	2.72	18	1
1:A:19:LEU:C	1:A:19:LEU:CD1	0.43	2.84	9	1
1:A:20:ASN:OD1	1:A:30:LEU:CD1	0.43	2.67	5	1
1:A:20:ASN:ND2	1:A:24:GLN:CD	0.43	2.71	5	1
1:A:121:VAL:HG22	1:A:142:MET:SD	0.43	2.54	13	1
1:A:44:ARG:HH11	1:A:44:ARG:HG2	0.43	1.72	1	1
1:A:112:ARG:HH11	1:A:112:ARG:HG2	0.43	1.74	15	1
1:A:32:TYR:CZ	1:A:50:VAL:HG21	0.43	2.49	11	1
1:A:11:SER:OG	1:A:11:SER:O	0.43	2.36	4	1
1:A:124:GLU:O	1:A:139:LYS:O	0.43	2.37	17	1
1:A:159:LYS:O	1:A:162:ALA:HB3	0.43	2.14	12	2
1:A:107:ILE:CD1	1:A:163:ALA:HB2	0.43	2.42	6	1
1:A:43:ASP:CB	1:A:45:ARG:HH21	0.43	2.27	15	1
1:A:122:ASN:HD22	1:A:123:TYR:H	0.42	1.55	18	1
1:A:55:ARG:HH11	1:A:55:ARG:HG3	0.42	1.73	1	1
1:A:45:ARG:CD	1:A:45:ARG:C	0.42	2.87	4	2
1:A:9:ASP:OD2	1:A:12:ALA:O	0.42	2.37	12	1
1:A:36:PRO:O	1:A:37:ASN:ND2	0.42	2.52	2	1
1:A:48:PHE:C	1:A:49:GLN:OE1	0.42	2.58	4	1
1:A:81:ASN:H	1:A:81:ASN:HD22	0.42	1.55	17	1
1:A:43:ASP:N	1:A:45:ARG:NH2	0.42	2.67	10	1
1:A:85:LYS:HD3	1:A:85:LYS:H	0.42	1.74	6	2
1:A:122:ASN:CG	1:A:123:TYR:N	0.42	2.72	20	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:23:ARG:NH2	0.42	2.28	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:TYR:OH	1:A:52:ILE:CG2	0.42	2.67	4	1
1:A:142:MET:HG3	1:A:166:ALA:HB1	0.42	1.92	8	1
1:A:124:GLU:CG	1:A:125:GLN:H	0.42	2.28	21	1
1:A:70:ASN:HD22	1:A:70:ASN:N	0.42	2.12	19	1
1:A:142:MET:SD	1:A:166:ALA:HB1	0.42	2.54	3	1
1:A:106:TYR:O	1:A:108:GLY:N	0.42	2.52	8	3
1:A:34:GLU:O	1:A:36:PRO:HD3	0.42	2.14	18	1
1:A:20:ASN:OD1	1:A:30:LEU:HD11	0.42	2.15	5	1
1:A:121:VAL:O	1:A:121:VAL:CG2	0.42	2.68	19	1
1:A:19:LEU:O	1:A:22:TYR:CD2	0.42	2.73	19	1
1:A:57:PHE:H	1:A:58:PRO:HD3	0.42	1.75	2	1
1:A:142:MET:SD	1:A:148:SER:OG	0.42	2.70	12	1
1:A:29:VAL:C	1:A:52:ILE:O	0.42	2.58	5	1
1:A:123:TYR:CD2	1:A:140:CYS:SG	0.42	3.12	20	1
1:A:124:GLU:CD	1:A:125:GLN:H	0.42	2.18	17	1
1:A:7:ALA:O	1:A:9:ASP:OD1	0.42	2.38	7	1
1:A:44:ARG:NH2	1:A:64:SER:OG	0.42	2.53	12	1
1:A:175:THR:C	1:A:177:SER:N	0.42	2.72	5	1
1:A:169:GLN:O	1:A:173:GLU:N	0.42	2.48	3	1
1:A:106:TYR:HD1	1:A:107:ILE:H	0.42	1.58	21	1
1:A:120:THR:HG22	1:A:143:GLY:HA3	0.42	1.91	12	1
1:A:35:LEU:N	1:A:35:LEU:HD23	0.42	2.30	1	1
1:A:151:THR:O	1:A:161:LEU:HD21	0.42	2.14	10	2
1:A:45:ARG:NH1	1:A:45:ARG:HG3	0.42	2.30	9	1
1:A:128:SER:O	1:A:135:GLY:O	0.41	2.38	8	1
1:A:37:ASN:O	1:A:37:ASN:CG	0.41	2.57	9	3
1:A:48:PHE:CD1	1:A:49:GLN:N	0.41	2.87	20	1
1:A:45:ARG:C	1:A:45:ARG:NE	0.41	2.73	14	1
1:A:61:GLU:O	1:A:71:ALA:CB	0.41	2.68	19	1
1:A:105:ASN:ND2	1:A:109:LEU:CD2	0.41	2.83	6	1
1:A:78:GLU:O	1:A:78:GLU:OE1	0.41	2.38	5	1
1:A:16:MET:O	1:A:20:ASN:N	0.41	2.43	20	3
1:A:11:SER:CB	1:A:17:GLU:OE1	0.41	2.67	19	1
1:A:165:LEU:CD1	1:A:166:ALA:N	0.41	2.77	8	1
1:A:124:GLU:CB	1:A:139:LYS:NZ	0.41	2.83	12	1
1:A:32:TYR:CD2	1:A:50:VAL:HG22	0.41	2.50	3	1
1:A:66:LYS:C	1:A:68:ALA:H	0.41	2.19	16	1
1:A:134:GLU:OE1	1:A:134:GLU:CA	0.41	2.68	4	1
1:A:20:ASN:OD1	1:A:23:ARG:CZ	0.41	2.69	9	2
1:A:19:LEU:CD1	1:A:77:VAL:HG22	0.41	2.41	3	1
1:A:23:ARG:NH2	1:A:76:ALA:HB1	0.41	2.30	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:145:LYS:C	1:A:145:LYS:CD	0.41	2.89	21	2
1:A:20:ASN:ND2	1:A:20:ASN:C	0.41	2.74	16	1
1:A:22:TYR:O	1:A:23:ARG:C	0.41	2.59	9	1
1:A:85:LYS:CD	1:A:85:LYS:H	0.41	2.27	21	1
1:A:140:CYS:O	1:A:148:SER:C	0.41	2.59	15	2
1:A:19:LEU:HD12	1:A:77:VAL:HG22	0.41	1.93	20	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:72:ALA:HB1	0.41	2.45	19	1
1:A:56:GLU:C	1:A:57:PHE:CG	0.41	2.93	4	1
1:A:67:GLU:O	1:A:71:ALA:N	0.41	2.51	18	1
1:A:140:CYS:O	1:A:148:SER:OG	0.41	2.39	12	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:20:ASN:N	0.41	2.31	20	1
1:A:105:ASN:O	1:A:105:ASN:OD1	0.41	2.38	20	1
1:A:23:ARG:HH11	1:A:23:ARG:CG	0.41	2.27	1	1
1:A:39:GLY:HA3	1:A:45:ARG:NH1	0.41	2.30	6	1
1:A:44:ARG:HG3	1:A:44:ARG:NH1	0.41	2.31	3	1
1:A:39:GLY:C	1:A:43:ASP:OD1	0.41	2.58	2	1
1:A:134:GLU:H	1:A:134:GLU:CD	0.41	2.18	4	1
1:A:9:ASP:CB	1:A:13:GLY:O	0.41	2.68	18	1
1:A:109:LEU:CD1	1:A:113:ILE:HD11	0.41	2.46	13	1
1:A:9:ASP:CG	1:A:13:GLY:O	0.41	2.60	13	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:32:TYR:OH	0.41	2.16	5	1
1:A:63:ARG:HD2	1:A:64:SER:H	0.41	1.75	5	1
1:A:79:ILE:HG13	1:A:80:LEU:H	0.41	1.76	14	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:19:LEU:C	0.41	2.36	1	1
1:A:80:LEU:N	1:A:80:LEU:CD1	0.40	2.72	3	1
1:A:33:GLN:N	1:A:33:GLN:OE1	0.40	2.55	12	1
1:A:20:ASN:OD1	1:A:30:LEU:HD12	0.40	2.16	20	1
1:A:63:ARG:NH1	1:A:63:ARG:HG3	0.40	2.31	4	1
1:A:43:ASP:O	1:A:45:ARG:NH2	0.40	2.54	10	1
1:A:62:GLY:O	1:A:67:GLU:CD	0.40	2.60	3	1
1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:NH1	0.40	2.30	5	1
1:A:50:VAL:O	1:A:50:VAL:CG1	0.40	2.69	5	1
1:A:77:VAL:HA	1:A:80:LEU:HD21	0.40	1.94	14	1
1:A:80:LEU:O	1:A:82:LYS:O	0.40	2.39	1	1
1:A:15:PHE:O	1:A:18:GLU:OE2	0.40	2.39	5	1
1:A:36:PRO:O	1:A:37:ASN:CG	0.40	2.60	6	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR entries. The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	155/179 (87%)	106±3 (68±2%)	34±4 (22±2%)	15±2 (10±1%)	2	11
All	All	3255/3759 (87%)	2228 (68%)	717 (22%)	310 (10%)	2	11

All 31 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	83	GLU	21
1	A	134	GLU	21
1	A	42	HIS	21
1	A	37	ASN	21
1	A	118	ARG	21
1	A	82	LYS	20
1	A	44	ARG	19
1	A	130	VAL	19
1	A	54	GLY	18
1	A	106	TYR	17
1	A	62	GLY	13
1	A	148	SER	13
1	A	12	ALA	11
1	A	14	PHE	10
1	A	65	LYS	10
1	A	63	ARG	7
1	A	176	GLY	7
1	A	132	GLY	6
1	A	105	ASN	5
1	A	178	GLY	5
1	A	133	PRO	4
1	A	8	GLY	4
1	A	41	PRO	3
1	A	67	GLU	3
1	A	144	GLN	2
1	A	7	ALA	2
1	A	143	GLY	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	13	GLY	2
1	A	28	VAL	1
1	A	175	THR	1
1	A	57	PHE	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR entries. The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	127/146 (87%)	99±5 (78±4%)	28±5 (22±4%)	3	30
All	All	2667/3066 (87%)	2073 (78%)	594 (22%)	3	30

All 94 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	147	TYR	21
1	A	141	LYS	21
1	A	45	ARG	21
1	A	161	LEU	21
1	A	113	ILE	20
1	A	106	TYR	19
1	A	118	ARG	18
1	A	15	PHE	18
1	A	145	LYS	17
1	A	81	ASN	16
1	A	52	ILE	16
1	A	23	ARG	16
1	A	160	GLN	14
1	A	85	LYS	14
1	A	80	LEU	14
1	A	167	TYR	13
1	A	123	TYR	13
1	A	142	MET	13
1	A	69	LYS	12
1	A	53	ASP	10
1	A	139	LYS	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	65	LYS	9
1	A	148	SER	9
1	A	22	TYR	9
1	A	171	LEU	9
1	A	35	LEU	8
1	A	107	ILE	8
1	A	117	LYS	8
1	A	66	LYS	8
1	A	120	THR	7
1	A	31	LYS	7
1	A	165	LEU	7
1	A	78	GLU	7
1	A	19	LEU	7
1	A	46	PHE	7
1	A	10	LEU	6
1	A	115	GLN	6
1	A	50	VAL	6
1	A	134	GLU	5
1	A	51	ILE	5
1	A	55	ARG	5
1	A	21	THR	5
1	A	48	PHE	5
1	A	77	VAL	4
1	A	111	ASN	4
1	A	70	ASN	4
1	A	38	SER	4
1	A	121	VAL	4
1	A	174	GLU	4
1	A	84	LYS	4
1	A	44	ARG	4
1	A	169	GLN	3
1	A	49	GLN	3
1	A	20	ASN	3
1	A	112	ARG	3
1	A	125	GLN	3
1	A	144	GLN	3
1	A	170	ILE	3
1	A	63	ARG	3
1	A	79	ILE	3
1	A	175	THR	3
1	A	155	LYS	2
1	A	140	CYS	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	110	ILE	2
1	A	116	LYS	2
1	A	9	ASP	2
1	A	67	GLU	2
1	A	168	LEU	2
1	A	105	ASN	2
1	A	133	PRO	2
1	A	33	GLN	2
1	A	24	GLN	1
1	A	16	MET	1
1	A	159	LYS	1
1	A	74	LYS	1
1	A	149	ILE	1
1	A	34	GLU	1
1	A	164	LYS	1
1	A	119	LEU	1
1	A	56	GLU	1
1	A	42	HIS	1
1	A	173	GLU	1
1	A	58	PRO	1
1	A	109	LEU	1
1	A	18	GLU	1
1	A	126	CYS	1
1	A	128	SER	1
1	A	30	LEU	1
1	A	154	THR	1
1	A	61	GLU	1
1	A	29	VAL	1
1	A	59	GLU	1
1	A	172	SER	1
1	A	64	SER	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided